



TITLE:

擬2次元d-pモデルにおける超伝導
揺らぎ効果(基研研究会「強結合超
伝導-Pseudogapを中心として」
,研究会報告)

AUTHOR(S):

小池上, 繁; 山田, 耕作

CITATION:

小池上, 繁 ...[et al]. 擬2次元d-pモデルにおける超伝導揺らぎ効果(基研研究会「強結合超伝導-Pseudogapを中心として」,研究会報告). 物性研究 1999, 72(4): 478-486

ISSUE DATE:

1999-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96656>

RIGHT:

擬 2 次元 d - p モデルにおける超伝導揺らぎ効果

京都大学 理学研究科 小池上 繁¹, 山田 耕作

1 Introduction

銅酸化物高温超伝導体 (HTSC) の擬ギャップ状態に対する理解は、多くの実験家の努力により着実に深まってきた。比熱 [1] や核磁気緩和率あるいは Knight シフト [2] の温度依存性からは、擬ギャップ温度 T^* において準粒子が何らかの束縛状態を形成して系全体のエントロピーを減少させ、擬 2 次元系に特有の強い熱揺らぎの影響を抑制していることが示唆されるが、この束縛状態がスピンの自由度だけでなく電荷の自由度にも関係する性質を持つことは角度分解光電子分光 (ARPES) [3] や走査トンネル分光 (STS) [4] により観測される電子状態の変化からも明らかである。HTSC は正常相において強い反強磁性スピン揺らぎを持つ系であり、それが $d_{x^2-y^2}$ -波の Cooper 対に対する強い引力として働くことになれば、超伝導転移温度 (T_c) よりもかなり高温側でも超伝導揺らぎの効果が現れると考えるのが妥当であろう。

以上のような可能性を半定量的に確認するために、我々はこれまでも斥力と引力の 2 通りの d - p モデルに対する解析 [5] [6] を行なっており、それぞれにおいて HTSC の物理の理解を深めてきた。そのようにして得られた知見から、HTSC における準粒子状態および磁気的相関を矛盾なく説明するためには、より現実的な斥力モデルから出発して Cooper instability を引き起こす引力相互作用を導出し、その引力による self-energy への寄与として超伝導揺らぎの効果を取り入れるという方法 [7] が適当であると考えた。そこで今回は以前の解析で採用した fluctuation exchange approximation (FLEX) に基づく引力相互作用から t -matrix を導出し、その normal self-energy への寄与を FLEX による寄与に加えて取り込み、 d 電子の Green 関数および normal self-energy を自己無撞着に求めることにする。

2 Formalism

2.1 Model Hamiltonian

解析に用いるモデルハミルトニアンは、擬 2 次元 d - p モデルであり以下のように表される。

$$H = H_0 + H_1 - \mu \sum_{\mathbf{k}\sigma} (d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma} + p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma}^y + p_{\mathbf{k}\sigma}^y p_{\mathbf{k}\sigma}^y), \quad (1)$$

¹E-mail:koike@ton.scphys.kyoto-u.ac.jp

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger & p_{\mathbf{k}\sigma}^x & p_{\mathbf{k}\sigma}^y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_d - \zeta_{\mathbf{k}}^z & \zeta_{\mathbf{k}}^x & \zeta_{\mathbf{k}}^y \\ -\zeta_{\mathbf{k}}^x & \varepsilon_p & \zeta_{\mathbf{k}}^p \\ -\zeta_{\mathbf{k}}^y & \zeta_{\mathbf{k}}^p & \varepsilon_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{\mathbf{k}\sigma} \\ p_{\mathbf{k}\sigma}^x \\ p_{\mathbf{k}\sigma}^y \end{pmatrix} - \frac{U}{4} N \langle n_0^d \rangle^2, \quad (2)$$

$$\zeta_{\mathbf{k}}^{x(y)} = 2i \sin \frac{k_x(y)}{2}, \quad \zeta_{\mathbf{k}}^z = t_z \cos k_z, \quad \zeta_{\mathbf{k}}^p = -4t_{pp} \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}, \quad (3)$$

$$H_1 = \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}(\neq 0)} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger d_{\mathbf{k}'\downarrow} d_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (N: \# \text{ of Cu sites}) \quad (4)$$

ここでエネルギーについては d - p 間の hopping を、波数については格子定数の逆数をその単位とした。また以降は d レベル ε_d がエネルギーシフト $U\langle n_0^d \rangle/2$ を既に含んでいるものと考えて、式 (2) の最後の項を無視する。

2.2 Green's function and Dyson equation

無摂動 Green 関数は、

$$\begin{aligned} \hat{G}^{(0)}(k)^{-1} &= \begin{pmatrix} G_d^{(0)}(k) & G_{dp^x}^{(0)}(k) & G_{dp^y}^{(0)}(k) \\ G_{p^x d}^{(0)}(k) & G_{p^x}^{(0)}(k) & G_{p^x p^y}^{(0)}(k) \\ G_{p^y d}^{(0)}(k) & G_{p^y p^x}^{(0)}(k) & G_{p^y}^{(0)}(k) \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} i\epsilon_n - \varepsilon_d + \zeta_{\mathbf{k}}^z & \zeta_{\mathbf{k}}^x & \zeta_{\mathbf{k}}^y \\ -\zeta_{\mathbf{k}}^x & i\epsilon_n - \varepsilon_p & \zeta_{\mathbf{k}}^p \\ -\zeta_{\mathbf{k}}^y & \zeta_{\mathbf{k}}^p & i\epsilon_n - \varepsilon_p \end{pmatrix} + \mu \hat{1}. \quad (5) \\ k &= (\mathbf{k}, i\epsilon_n = i\pi T(2n+1)), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned}$$

Dyson 方程式は、

$$G_d(k)^{-1} = G_d^{(0)}(k)^{-1} - \Sigma_n(k). \quad (6)$$

$\Sigma_n(k)$ (d 電子の normal self-energy) は、FLEX に基づいて求まる部分 $\Sigma_n^F(k)$ と t -matrix からの寄与による部分 $\Sigma_n^T(k)$ とからなる。

$$\Sigma_n(k) = \Sigma_n^F(k) + \Sigma_n^T(k). \quad (7)$$

2.3 FLEX

以下の方程式により $\Sigma_n^F(k)$ を得る。

$$\Sigma_n^F(k) = \sum_{\mathbf{k}'} V_n(k - \mathbf{k}') G_d(\mathbf{k}'), \quad (8)$$

$$V_n(q) = \frac{3}{2} \frac{U^2 \chi(q)}{1 - U \chi(q)} + \frac{1}{2} \frac{U^2 \chi(q)}{1 + U \chi(q)} - U^2 \chi(q), \quad (9)$$

$$\chi(q) = - \sum_{\mathbf{k}} G_d(\mathbf{k}) G_d(\mathbf{q} + \mathbf{k}). \quad (10)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \cdots = \frac{T}{N_L} \sum_{\epsilon_n} \sum_{\mathbf{k}} \cdots, \quad q = (\mathbf{q}, i\nu_l = i2\pi Tl), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

N_L は数値積分で用いる第 1 Brillouin ゾーン内の格子点の数である。

2.4 t -matrix approximation

t -matrix に対する Bethe-Salpeter 方程式は、

$$t(k_1, k_2; q) = V_a(k_1 - k_2) - \sum_{k'_1} V_a(k_1 - k'_1) G_d(k'_1) G_d(q - k'_1) t(k'_1, k_2; q), \quad (11)$$

$$V_a(q) = \frac{3}{2} \frac{U^2 \chi(q)}{1 - U \chi(q)} - \frac{1}{2} \frac{U^2 \chi(q)}{1 + U \chi(q)} + U. \quad (12)$$

(11) を解くと、 $t(k_1, k_2; q)$ が次のように近似的に求まる。

$$t(k_1, k_2; q) = \frac{g(q) \phi(k_1; q) \phi^*(k_2; q)}{1 - \lambda_{\max}(q)}, \quad (13)$$

$$\lambda_{\max}(q) \phi(k; q) = - \sum_p V_a(k - p) G_d(p) G_d(q - p) \phi(p; q), \quad (14)$$

$q = (0, 0)$ とすると (14) は Eliashberg 方程式である。

$$g(q) = \int dk_1 \int dk_2 \phi^*(k_1; q) V_a(k_1 - k_2) \phi(k_2; q), \quad (15)$$

$$\int dk_1 |\phi(k_1; q)|^2 = 1. \quad (16)$$

固有値方程式 (14) においては、最大固有値 $\lambda_{\max}(q)$ に対する解 $\phi(k; q)$ だけを考慮する。こうして得られた t -matrix からの寄与 $\Sigma_n^T(k)$ は、

$$\Sigma_n^T(k) = \sum_q t(k, k; q) G_d(q - k). \quad (17)$$

3 Details of Numerical Calculation

数値計算は Fujitsu VPP500 および VPP700 の 8PU-32PU の並列ジョブで行ない、畳み込みの形を取る多重積分の計算には数値計算ライブラリ SSL II/VP の多次元複素 FFT サブルーチン `dvmcft` を利用した。

収束条件:

$$\text{全ての } k = (\mathbf{k}, i\epsilon_n) \text{ に対し、} \frac{|\Sigma_n^{(r)}(k) - \Sigma_n^{(r-1)}(k)|}{|\Sigma_n^{(r)}(k)|} < 10^{-2}. \quad (18)$$

固有値方程式 (14) を解くためには冪乗法 (power method) を用いるが、そのときの $\phi(k; q)$ に課する収束条件: 各々の $q = (\mathbf{q}, i\omega_l)$ について、

$$\text{全ての } k = (\mathbf{k}, i\epsilon_n) \text{ に対し、} \frac{|\phi^{(r)}(k; q) - \phi^{(r-1)}(k; q)|}{\max\{|\phi^{(r)}(k; q)|\}_k} < 10^{-2}. \quad (19)$$

(14)-(16) における各 q についての計算は独立に実行できる。ここではまず、松原振動数 0 を持つ q について波数ベクトル \mathbf{q} を 32 個の PU に振り分けて $\phi(k; q)$ を計算し、そのうち繰り返しの打ち切り回数 (50 回) に達してもなお収束しない \mathbf{q} と $g(q) > 0$ (この場合、束縛状態が正しく求まっていないと判断できる。) となる \mathbf{q} とを除外してから、次に高い松原振動数 $i2\pi T$ を持つ q についての計算に進む、というようにアルゴリズムを設定した。

4 Results

数値計算に用いたパラメータおよび得られた状態は、次の通りである。

T	ε_d	ε_p	t_{pp}	t_z	U	μ	n_d	n_p	δ
0.00960	1.28	0.00	0.35	0.04	2.90	2.85	0.696	0.476	0.172

ここで $n_{d(p)}$ はそれぞれ $d(p)$ -ホール数であり、 $\delta = n_d + n_p - 1$ である。 n_d/n_p は約 1.46 で、この値は underdoped の Y-系のそれに近い。格子点の数は $N_L = 32 \times 32 \times 6$ とし、松原振動数 $(2n+1)\pi T$ のカットオフを $|n| \leq 1024$ と設定した。松原振動数空間での物理量は Padé 近似により数値的に解析接続するが、特に一粒子スペクトルについては角度分解光電子分光 (ARPES) や走査トンネル分光 (STS) での実験結果と比較できるように、式 (20)(20) で定義される $A(k_x, k_y, \omega), \rho(\omega)$ を計算した。 $\rho(\omega)$ については有限サイズによる副作用を避けるために、SSL II/VP のサブルーチン dbicd3 と dbifd3 を利用して $k_x - k_y$ 面内で spline 補間・積分した上で解析接続した。

$$A(k_x, k_y, \omega) = -\frac{1}{\pi} \int dk_z [Im G_d(\mathbf{k}, \omega) + Im G_{p^x}(\mathbf{k}, \omega) + Im G_{p^y}(\mathbf{k}, \omega)], \quad (20)$$

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int d\mathbf{k} [Im G_d(\mathbf{k}, \omega) + Im G_{p^x}(\mathbf{k}, \omega) + Im G_{p^y}(\mathbf{k}, \omega)]. \quad (21)$$

図 1 には $\lambda_{\max}(Q_x, Q_y, 0, i2\pi Tl)$ の関数形を示した。ただし、 t -matrix の計算に含めなかった q については、その値を 0 としてある。 $T = T_c$ では $\lambda_{\max}(0, 0, 0, 0) = 1$ となるべきだが、ここで計算した温度は転移温度よりかなり高温であることが分かる。また、図 2 には各々の $q = (\mathbf{Q}, 0)$ に対して得られる $|g(q)|^{1/2} \phi(K_x, K_y, 0, 0; q)$ の波数依存性を示した。 \mathbf{Q} が $\mathbf{0}$ から離れた場合には対称性が低くなるものの、全て $d_{x^2-y^2}$ 波に似た波数依存性を持っており、これらの成分についての normal self-energy に対する寄与は引力的であることが分かる。

図 3 では、 $A(k_x, k_y, \omega)$ の波数依存性および振動数依存性を示した。2 次元波数ベクトル $(\pi, 0)$ 付近での intensity が Fermi 面近傍であるにも関わらず減少していることが分かるが、振動数依存性からは pseudogap の振舞いは見られない。しかしながら、図 4 に示すように Fermi 面付近の強い散乱により $\omega = 0$ での状態密度が減少する。

図 5、図 6 には $\chi^{RPA}(\mathbf{q}, \omega) = \chi(\mathbf{q}, \omega)/(1 - U\chi(\mathbf{q}, \omega))$ の結果を表した。やはり pseudogap の振舞いは見られないものの、 $\mathbf{q} = (\pi, \pi - \delta, \pi)$ で incommensurate なピークが発達していることがわかる。

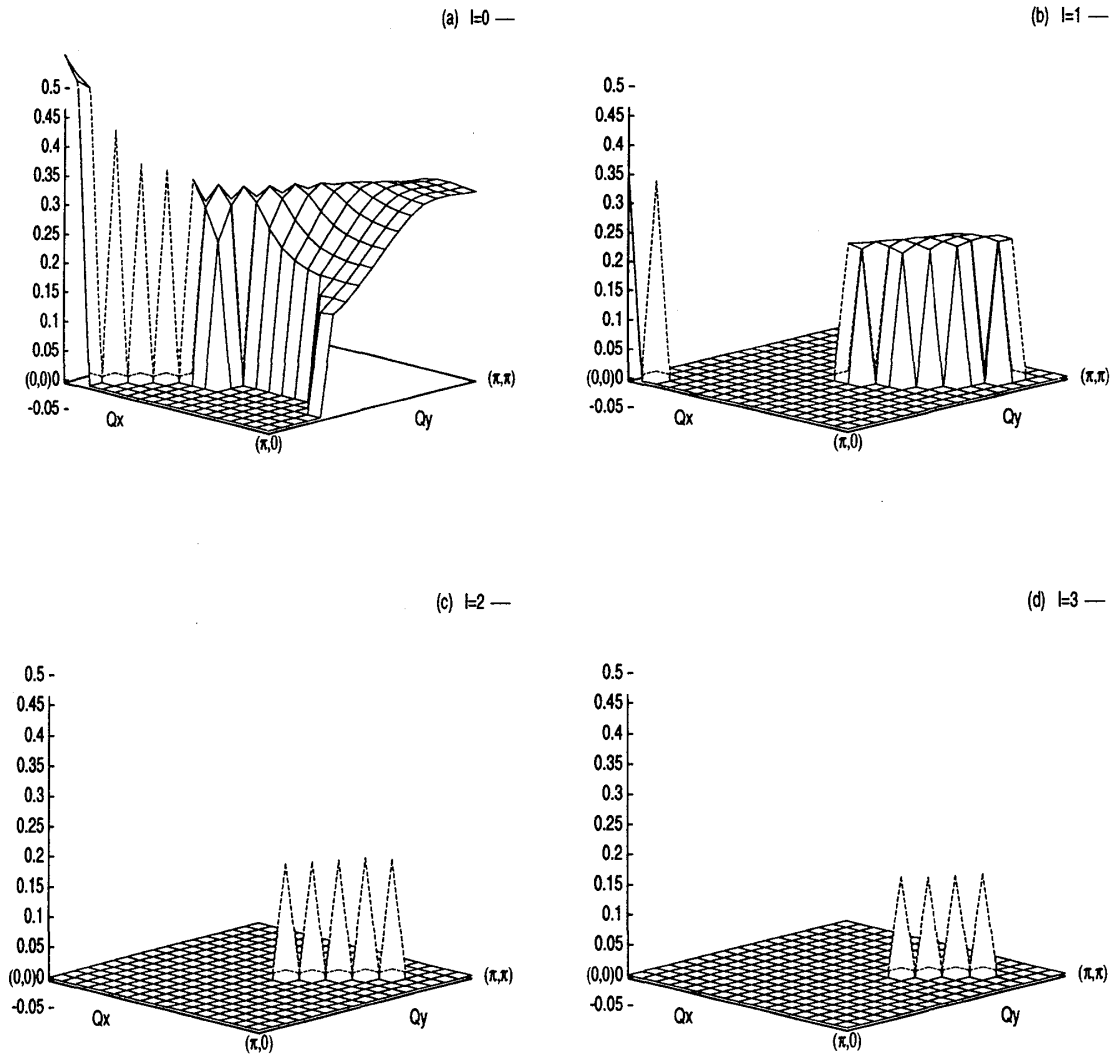


図 1: $\lambda_{\max}(Q_x, Q_y, 0, i2\pi Tl)$ (a) $l=0$ (b) $l=1$ (c) $l=2$ (d) $l=3$

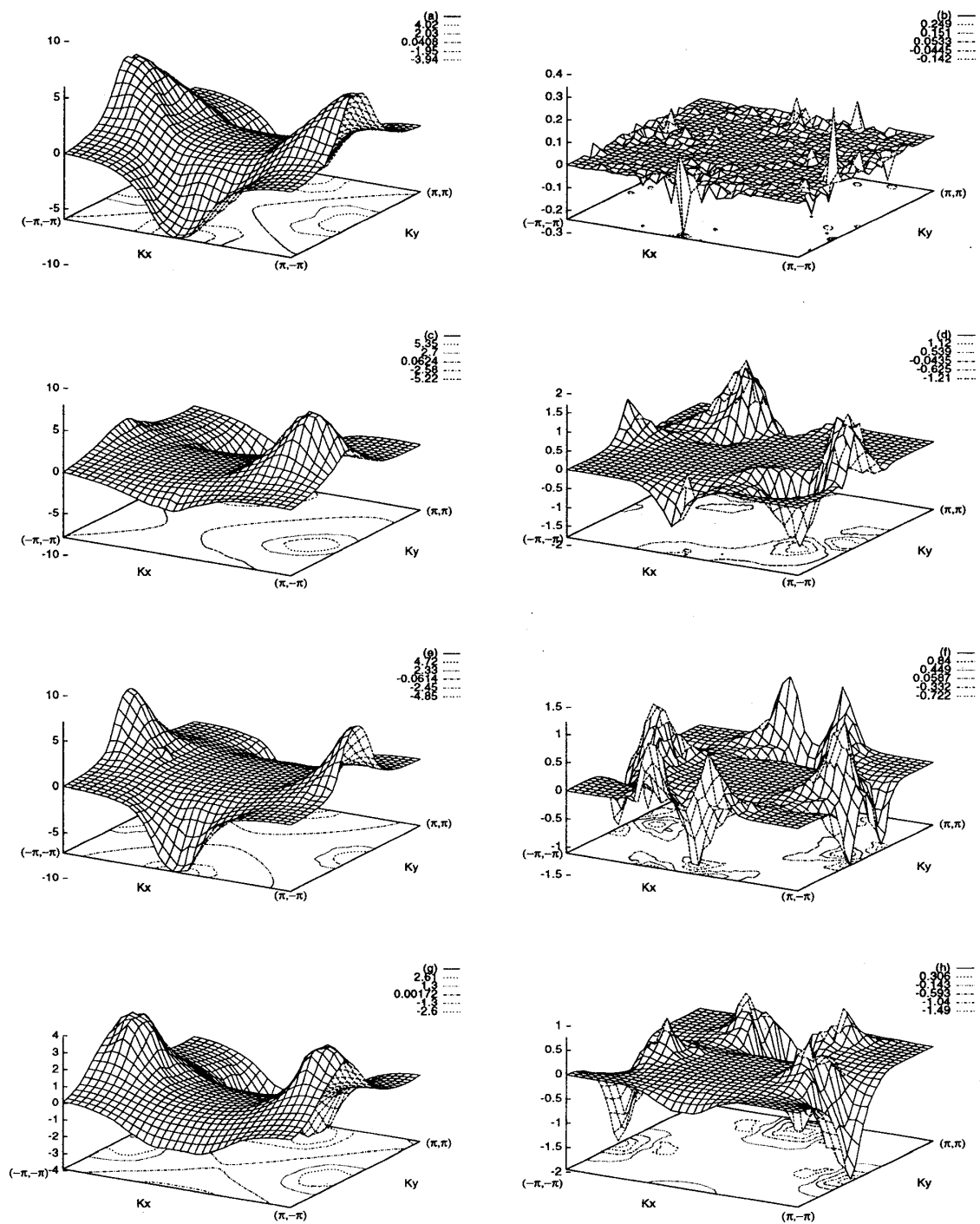


図 2: $|g(\mathbf{Q}, 0)|^{1/2} \phi(K_x, K_y, 0, 0; \mathbf{Q}, 0)$: $\mathbf{Q} = (0, 0, 0)$ (a) real part (b) imaginary part; $\mathbf{Q} = (\pi/2, \pi/2, 0)$ (c) real part (d) imaginary part; $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, 0)$ (e) real part (f) imaginary part; $\mathbf{Q} = (\pi, \pi/2, 0)$ (g) real part (h) imaginary part

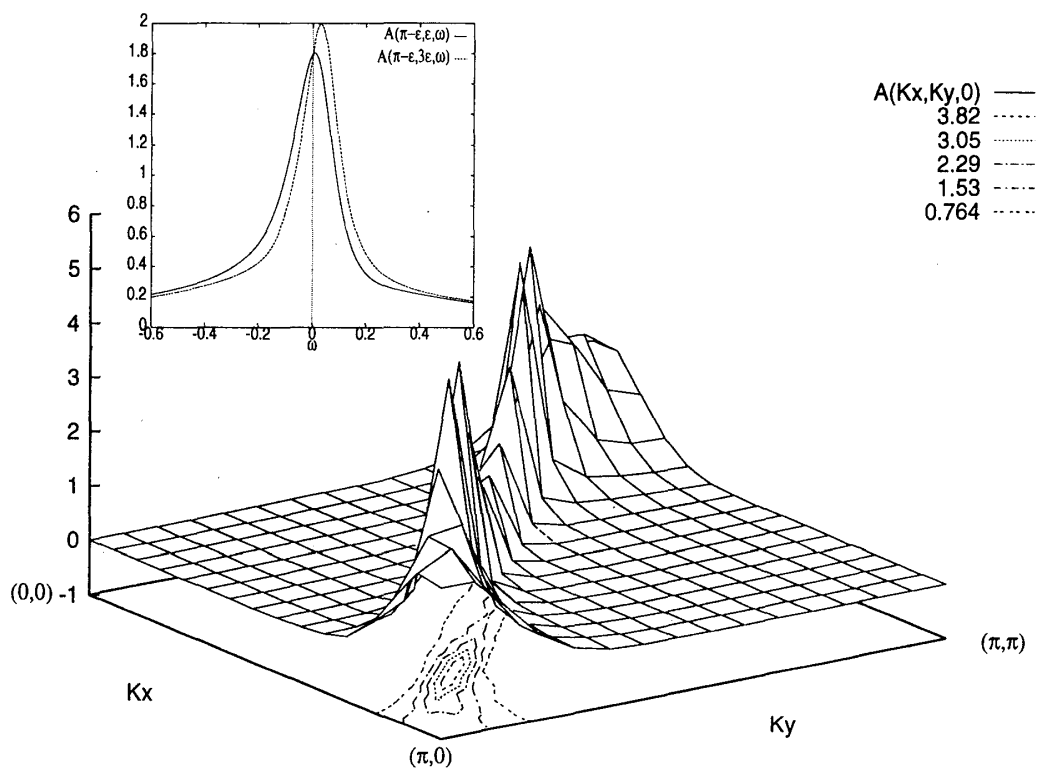


図 3: main: $A(K_x, K_y, 0)$; inset: $A(\pi - \varepsilon, \varepsilon, \omega)$ (solid line) $A(\pi - \varepsilon, 3\varepsilon, \omega)$ (dashed line); $\varepsilon = \pi/16$

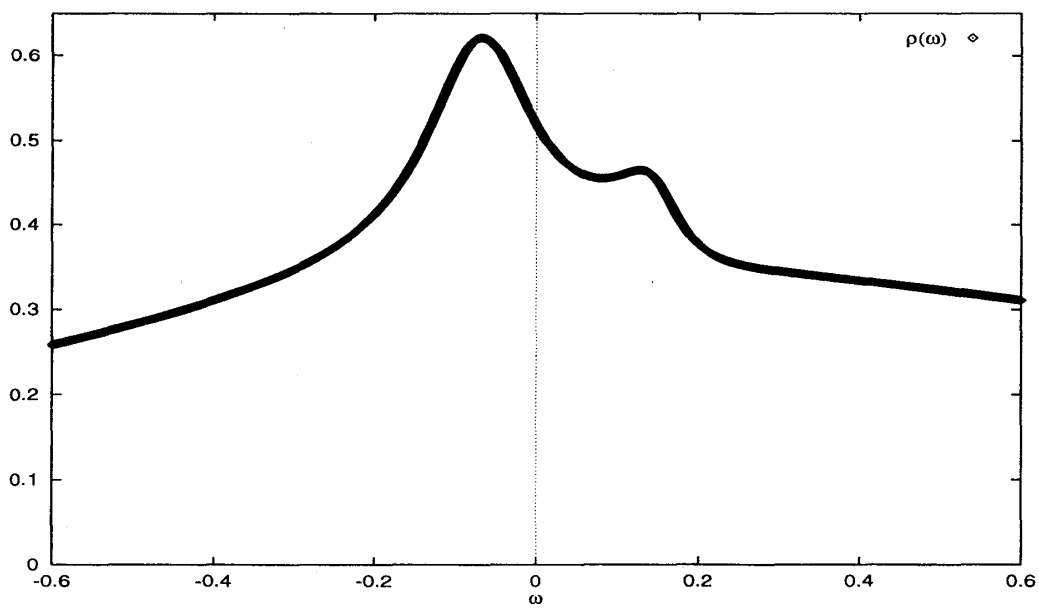


図 4: $\rho(\omega)$

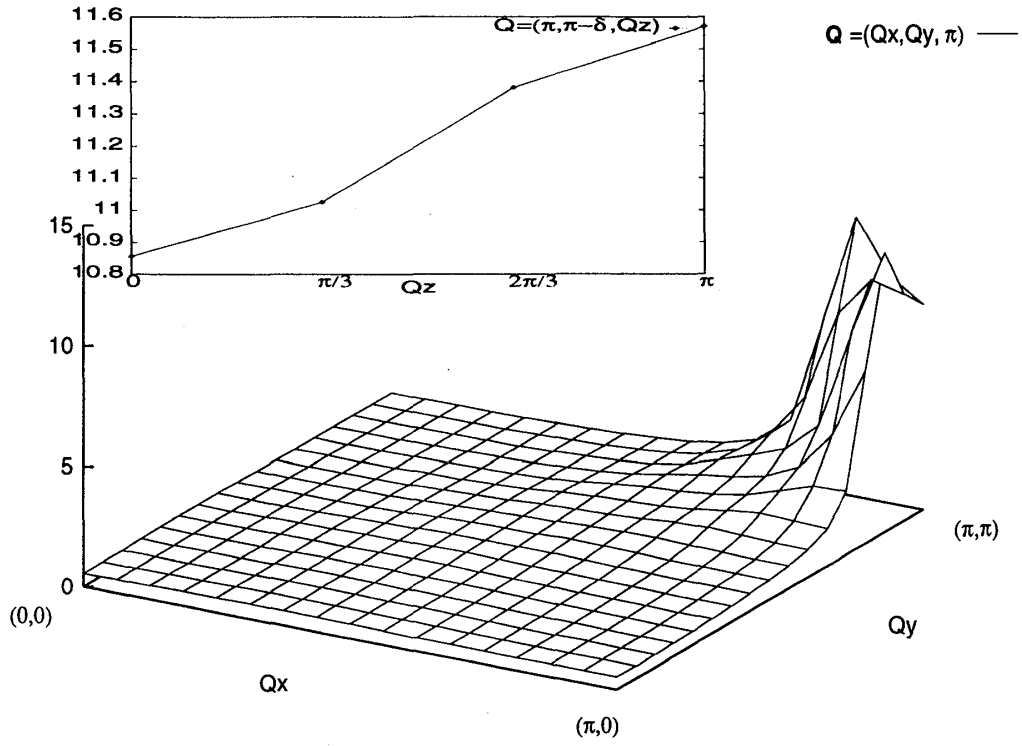


図 5: main: $\chi^{RPA}(Q_x, Q_y, \pi, 0)$; inset: $\chi^{RPA}(\pi, \pi - \delta, Q_z, 0)$; $\chi^{RPA} = \chi/(1 - U\chi)$; $\delta = \pi/8$

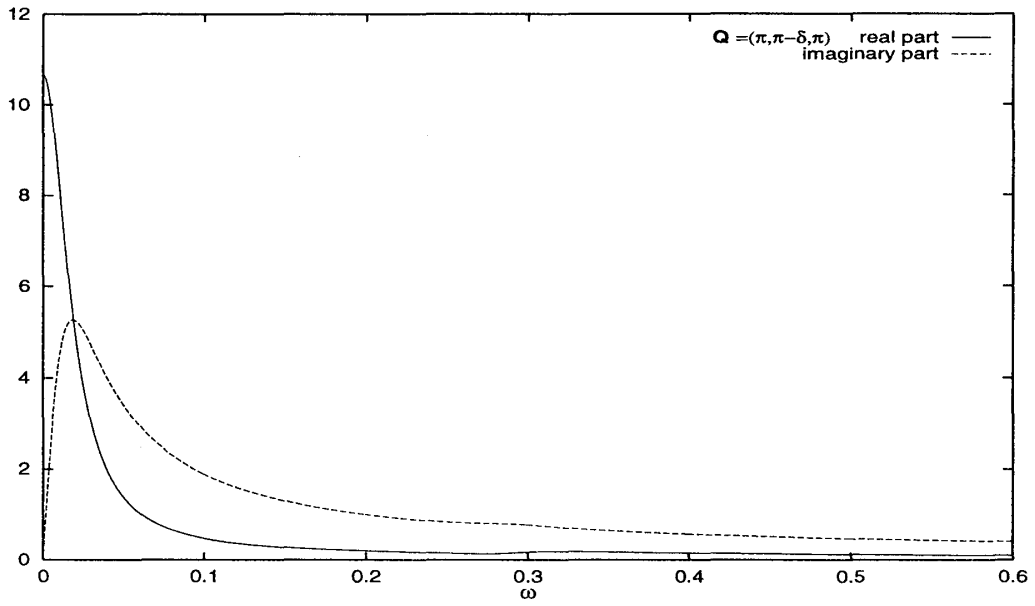


図 6: $\chi^{RPA}(\pi, \pi - \delta, \pi, \omega)$; real part (solid line) imaginary part (dashed line)

5 Discussion and Conclusion

self-consistent な解が得られたことにより反強磁性スピン揺らぎと超伝導揺らぎが共存する状態が安定となることが分かった。さらに、その両方の効果により Fermi 面の $(\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ 付近での散乱が増大して状態密度が抑えられることが明らかになった。しかしながら、温度が高く超伝導不安定性の生じる領域には十分近付いていないために pseudogap は生じなかった。

今後の解析では、より低い温度での計算や t_z を変化させて次元性が電子状態に与える影響を調べることにより、pseudogap の生じる条件を探索する。また、 T_c を計算して実験によって得られている相図を再現したい。

謝辞

この研究に関して有益な議論をしていただいた、伊土政幸、小田研、紺谷浩、瀧本哲也、小林晃人、一宮尚志、柳瀬陽一、重城貴信の各氏に感謝します。また、数値計算には京都大学、東京大学物性研究所、九州大学の各大型計算機センターの設備を利用しました。感謝します。

参考文献

- [1] J. W. Loram *et al.*, Physica C **282-287** (1997), 1405.
- [2] K. Ishida *et al.*, Phys. Rev. B **58** (1998), R5960.
- [3] M. R. Norman *et al.*, Nature **392** (1998), 157.
- [4] Ch. Renner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998), 3606.
- [5] S. Koikegami, S. Fujimoto and K. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), 1438.
- [6] S. Koikegami and K. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998), 1114.
- [7] T. Dahm, D. Manske, and L. Tewordt, Phys. Rev. B **55** (1997), 15274.